1.6 양자역학의 확립

• 하이젠베르크의 행렬역학

1925년 하이젠베르크는 보어의 원자모형에서 얻은 결과들을 이끌어 낼 수 있고, 그때까지의 실험결과들을 설명할 수 있는 새로운 이론을 제안하였으니 이것이 곧 행렬역학(Matrix Mechanics)으로 알려진 양자역학의 이론체계이다. 하이젠베르크는 원자 내부의 전자의 위치등을 고전적인 방식으로 정확히 알아내는 것은 불가능하며, 그렇게 접근하는 것은 원자현상을 이해하는 적합한 방식이 아니라고 생각하였다. 그는 실험적으로 측정된 결과들을 설명할 수 있는 이론체계가 있다면 그것으로 충분하다고 생각하였다. 그때까지 알려진 원자현상들은 분광학으로 체계화되어 있었으며, 리츠-리드버그(Ritz-Rydberg) 결합원리라는 규칙으로 알려져 있었다. 그것은 분광선이 두 개의 지수(i,j)로 된 짝으로 표시되며, 분광선들은 부분적으로 구성법칙을 충족시킨다는 것이다. 예컨대 두 분광선의 진동수들 ν_{ik} 와 ν_{kj} 는 새로운 진동수 $\nu_{ij} = \nu_{ik} + \nu_{kj}$ 를 준다는 식이다. 분광선의 진동수가 두 개의 지수들, 즉 두 개의 에너지 준위의 짝으로 표현된다는 것은 이미 보어의 모형에서 나타난 바 있다.

$$\nu_{nm} = (E_n - E_m)/h$$

하이젠베르크는 원자 현상과 관련된 모든 측정 가능한 물리적 양들(physical observables)이 이처럼 원자의 에너지 준위를 나타내는 지수의 짝으로 표현되어야 한다고 생각하였다. 예를 들어 위치 표현의 시간 변화는 두 개의 지수로 된 짝으로 다음과 같이 표현되어야 한다고 생각하였다.

$$X_{nm}(t) = X_{nm}\exp(2\pi i\nu_{nm}t)$$

또한 위치의 제곱을 표시하는 물리적 양의 표현도 역시 지수의 짝으로 표현되어야 한다고 생각하였다. 그리고, X^2 는 차원분석을 하면 X 와 X의 곱으로 주어져야 하므로 다음과 같이 쓸 수 있게 된다.

$$(X^2)_{nm}(t) = \sum_{k,l,k',l'} C_{nmklk'l'}\, X_{kl}(t)\, X_{k'l'}(t)$$

여기서 $(X^2)_{nm}(t)$ 는 $(E_n - E_m)/h$ 로 $X_{kl}(t)\, X_{k'l'}(t)$ 는 $(E_k - E_l + E_{k'} - E_{l'})/h$ 로 각각 연관되고, 이 둘이 서로 같은 물리량을 표현하여야 하므로 $k = n, l = k', l' = m$ 이 되어야 한다. 즉, $(X^2)_{nm}(t) = \sum_k C_{nmk}\, X_{nk}(t)\, X_{km}(t)$ 가 되어야 한다. 한편, 물리량 사이의 관계가 고전적인 경우와 동일해야 한다는 대응원리(correspondence principle)를 적용하면, X^2 는 XX 와 같아야 하므로 $C_{nmk} = 1$ 이 되어야 한다.

즉, $X^2_{nm}(t) = \sum_k X_{nk}(t)\, X_{km}(t)$ 의 관계가 성립하며, 이는 앞서 언급한 리츠-리드버그 결합원리를 만족한다. 한편, 속도에 해당하는 위치의 시간미분은 다음과 같이 주어지므로,

$$\frac{d}{dt}X_{nm}(t) = 2\pi i\nu_{nm}X_{nm}(t) = \frac{2\pi i}{h}(E_n - E_m)X_{nm}(t) = \frac{i}{\hbar}\left(E_n X_{nm}(t) - X_{nm}(t)E_m\right),$$

그런데, 분광선 자료에서 에너지를 나타내는 물리량을 항상 대각 원소(diagonal element)로 나타나므로 이를 H로 표현하면, 위치의 시간미분은 다음과 같이 쓸 수 있게 된다.

$$\frac{d}{dt}X = \frac{i}{\hbar}\,(HX\ - XH) \equiv \frac{i}{\hbar}\,[H, X]$$

여기서, 운동량이 P, 질량이 m인 자유입자의 에너지는 $H = \frac{P^2}{2m}$로 표현되므로 이를 위의 관계식에 적용하면 $\frac{d}{dt}X = \frac{i}{\hbar}\,[H, X] = \frac{i}{2m\hbar}\,[P^2, X] = \frac{i}{2m\hbar}\,(P[P, X] + [P, X]P)$ 의 관계식을 얻게 되고, 위치의 시간미분에 해당하는 속도는 $\frac{P}{m}$ 로 표현되므로 이 두 표현이 동일하려면 다음의 관계식이 만족되어야 한다.

$$[P, X] = \frac{\hbar}{i} \quad \text{또는} \quad [X, P] = XP - PX = i\hbar\,.$$

이는 위치와 운동량이 고전 물리학에서처럼 가환(commutative)의 관계($XP = PX$)에 있지 않음을 보여준다. 이는 물리량들(physical observables)이 비가환적(noncommutative)인 연산자들(operators)로 표현되는 양자역학의 일면을 보여주고 있다.
자유입자가 아닌 경우, 하밀토니안(Hamiltonian)으로 불리는 H는 위치에너지 항을 갖는다.

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$$

여기서, 위치에너지 $V(X)$가 X의 다항식으로 표현될 경우 위의 관계식을 적용하면 다음과 같이 됨을 알 수 있다: $[P, V(X)] = \frac{\hbar}{i}\frac{dV(X)}{dX}$.
한편, 앞에서처럼 운동량 P도 $P_{nm}(t) = P_{nm}\exp(2\pi i\nu_{nm}t)$로 표현하고 P에 대한 시간미분을 고려하면, 이는 앞에서와 동일하게 $\frac{d}{dt}P = \frac{i}{\hbar}\,(HP - PH) = \frac{i}{\hbar}\,[H, P]$ 의 관계식을 준다. 그러므로 $\frac{d}{dt}P = \frac{i}{\hbar}\,[\frac{P^2}{2m} + V(X), P] = \frac{i}{\hbar}\,[V(X), P] = -\frac{dV(X)}{dX}$ 의 관계식을 얻는다. 운동량의 시간미분은 힘에 해당하므로, 이는 고전적인 관계식 $F = -\frac{dV(X)}{dX}$에 대응됨을 알 수 있다. 이와 같이 하이젠베르크의 이론에서 물리량의 표현은 행렬(Matrix) 표현과 같이 주어지고, 모든 물리량의 계산이 이러한 방식을 통하여 이루어졌으므로 이 이론은 행렬역학으로 불러지게 되었다.

• 슈뢰딩거의 파동역학

하이젠베르크의 행렬역학 이론이 발표된 지 6개월 여 지난 2006년 1월부터 6월까지 슈뢰딩거는 세 차례에 걸친 논문발표를 통하여, 드브로이의 물질파 가설을 진전시킨 물질파의 방정식을 완성하였다. 먼저 계의 에너지(E)가 정해진 경우, 물질파의 상태가 시간에 의존하지 않는 다음의 방정식으로 주어지며(여기서는 간편함을 위하여 1차원의 경우를 생각한다),

$$H(P = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}, x)\psi(x, t) = E\psi(x, t)$$

시간에 의존하는 경우 물질파의 상태가 다음의 방정식에 의하여 결정된다고 하였다.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = H(P = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, x)\psi(x, t)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) \ .$$

이 방정식을 우리는 슈뢰딩거의 (파동)방정식이라고 하며, 이는 물질파 상태의 시간에 따른 변화를 알게 하여 준다. 위의 첫 번째 방정식은 시간에 독립적인 슈뢰딩거 방정식이라고 하며 주어진 물리계에서 허용되는 에너지 값들과 그에 해당하는 상태들을 알게 해 준다. 슈뢰딩거는 자신의 파동방정식을 써서 수소원자의 에너지 준위와 파동상태들을 계산하였으며, 보어의 결과들을 포함함을 보였다. 이러한 슈뢰딩거의 파동역학 체계는 하이젠베르크의 행렬역학 체계와 일견 달라 보였지만, 슈뢰딩거는 이내 두 이론체계가 동등함을 증명하였다. 슈뢰딩거의 파동방정식 체계는 하이젠베르크의 행렬역학 방식에서 미진했던 계의 상태에 대한 정보를 파동의 상태 변화를 통하여 기술함으로써 자연스럽게 보완할 수 있었다.

• 코펜하겐 해석

슈뢰딩거의 파동함수가 무엇을 의미하는지는 한동안 불분명하였다. 슈뢰딩거는 파동함수가 물질의 밀도와 관련되어 있다고 생각하였다. 하지만, 슈뢰딩거의 파동함수는 복소함수로서 실제 물질적인 파동을 의미한다고 보기는 어렵다. 파동함수에 대한 표준적인 해석은 슈뢰딩거의 이론체계가 발표된 지 얼마 지나지 않은 2006년 7월 보른(M. Born)에 의해서 제안되었다. 보른은 전자빔의 산란실험 연구를 통하여, 산란된 물질파동이 여러 평면파의 중첩으로 표현될 수 있으며, 여기서 평면파들은 각각이 특정한 운동량을 지닌 드브로이의 물질파동(즉, 입자)들이라고 생각하였다. 이러한 생각에서 그는 파동함수의 절대값의 제곱이 그 물질이 존재할 확률에 해당한다고 제안하였다. 즉,

$$|\psi(x,t)|^2 dx = P(x,t)dx$$

여기서 $P(x,t)dx$ 는 x와 $x+dx$사이에서 입자가 발견된 확률을 의미한다. 그런데 모든 영역에 걸쳐서 입자가 발견될 확률은 1이 되어야 하므로 파동함수는 다음의 조건을 만족하여야 한다. $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t\}|^2 dx = 1$

때문에 주어진 상태에서 어떤 물리적 양 A의 기대치는 다음과 같이 주어진다.

$$< A >= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\, A\, \psi(x,t)\, dx \ .$$

이와 같은 해석체계를 코펜하겐 해석(Copenhagen interpretation)이라고 부르는데, 이는 보어와 하이젠베르크, 파울리 등이 코펜하겐을 중심으로 양자역학의 이러한 이론체계를 전개하였기 때문이다. 이후 코펜하겐 해석은 표준적인 양자역학 체계로 정립되었다.

• 불확정성 원리와 상보성

양자역학의 또 하나의 주요 요소로서 우리는 불확정성 원리(uncertainty principle)를 빼놓을 수 없다. 불확정성 원리는 1927년 하이젠베르크가 발견하였는데, 이는 양자역학을 고전물리학과 구분 짓는 대표적 특성의 하나이다. 불확정성 원리는 행렬역학에서 나온 위치와 운동량의 비가환적 특성에서 비롯된다. 즉, $[X,P] = i\hbar$ 의 관계식에서 우리는 $\triangle X \triangle P \geq \frac{\hbar}{2}$ 라는 일반적인 관계식을 이끌어 낼 수 있다. 여기서 $\triangle X$, $\triangle P$는 각각 위치

와 운동량의 불확정성을 나타낸다: $(\triangle X)^2 \equiv \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle$, $(\triangle P)^2 \equiv \langle (P - \langle P \rangle)^2 \rangle$). 이러한 특성은 입자와 파동의 이중성과도 밀접하게 연관되어 있으며, 이는 고전적인 체계와 달리 우리는 위치와 운동량 모두를 함께 정확하게 기술할 수는 없다는 것이다. 보어는 이를 상보성(complementarity)으로서 표현하였다. 이는 예컨대, 위치나 운동량의 둘 중 하나만 택하여 우리가 정확히 기술할 수 있다는 것이다. 상보성은 앞에서 나왔던 입자와 파동의 이중성에도 동일하게 적용된다. 우리가 이중슬릿 간섭실험에서 간섭현상을 보는 것은 파동성을 통하여 현상을 기술하는 것이며 이 경우 입자성을 함께 기술할 수는 없고, 이중슬릿의 어느 스크린을 통과하였는지 탐지한다는 것은 우리가 입자성을 기술하는 것이 되어 동시에 파동성을 기술할 수는 없다는 것이다. 다시 말하면, 입자성이나 파동성의 둘 중 하나를 택하여 현상을 기술하여야 한다는 것이다. 이러한 생각은 일반적으로 고전체계를 양자역학적 체계로 바꾸는 양자화(quantization)의 전 과정에 스며들어 있다. 예컨대, 고전적으로 위치와 운동량은 고전적인 위상공간에서 서로 독립적인 양이나, 양자역학에서 우리는 둘 중 하나만 택하여 상태를 나타내는 파동함수의 독립변수로 기술할 수 있다. 이에 대해서는 나중에 다시 살펴보도록 하겠다.